ブラウン運動の理論

中野藤生（名大理）

（2月2日受理）

§1 問題

まず在来のブラウン運動の理論を，Chandrasekhar の論文[1]を手本にして，説明しておこう。できるだけ簡単に書くために，この節だけでなく，全体をつうじて1次元の話として書くが，3次元の問題に読みかえることは，いたつて容易であると思う。時 t に粒子が速度 v をもつことの確率分布函数 $P(v,t)$ がみたすべきスモルコフスキー方程式は，

$$P(v,t+\Delta t)=\int P(v-\Delta v,t)\,\psi(v-\Delta v;\Delta v)\,d(\Delta v). \tag{1}$$

$\psi(v,\Delta v)$ は Δt の間に，v が Δv だけ増すことの転移確率を表わすのであつて，ランジバン方程式，

$$\frac{dv}{dt}=-\beta v+A(t) \tag{2}$$

にもとづいて，定められる。まず（2）の積分，

$$\Delta v=-\beta v\,\Delta t+B(\Delta t) \tag{2a}$$

$$B(\Delta t)=\int_t^{t+\Delta t}A(t')\,dt' \tag{2b}$$

において，$A(t)$ が Gaussian random process であると，$B(\Delta t)$ の確率分布はガウス分布であつて，分布函数が

$$w(B(\Delta t)) = \frac{1}{(4\pi q \Delta t)^{1/2}} \exp\left[\frac{-B(\Delta t)^2}{4q\Delta t}\right] \tag{3}$$

で与えられる。$2q\Delta t$ は$B(\Delta t)$ の平均自乗偏差であるから，

$$q = \frac{1}{2\Delta t} \langle B(\Delta t)^2 \rangle = \frac{1}{2\Delta t} \left\{ \int_0^{\Delta t} dt' \langle A(t) A(t+t') \rangle \right\}^2$$

$$= \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} d\tau (\Delta t - \tau) \langle A(t) A(t+\tau) \rangle$$

$$\simeq \int_0^{\infty} d\tau \langle A(t) A(t+\tau) \rangle \tag{4}$$

と書ける。Δt は$A(t)$ の相関時間に比べると，ずつと大きい一方，Δt の間にq は殆ど変化しないほどに，小さくもあることが必要である。q の値が

$$q = \beta kT/m \tag{5}$$

であることを，あとで要求しなければならない。（2a）と（3）とから，$\psi(v, \Delta v)$ は

$$\psi(v, \Delta v) = (4\pi q \Delta t)^{-1/2} \exp\left[-\frac{|\Delta v + \beta v \Delta t|^2}{4q\Delta t}\right] \tag{6}$$

であることになる。（1）において，Δt，Δv について，テーラー展開をおこない，（6）をつかうと，

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \beta \frac{\partial}{\partial v}(vP) + q \frac{\partial^2}{\partial v^2} P \tag{7}$$

がえられる。これが，Fokker-Planck の方程式である。（7）の初期条件，

$$P(v, 0) = \delta(v - v_0) \tag{8}$$

のもとにおける解は，（5）が成立つていると，

$$P(v, t) = \left[\frac{m}{2\pi kT(1 - e^{-2\beta t})}\right]^{1/2}$$

$$\times \exp\left[-\frac{m(v-v_0 e^{-\beta t})^2}{2kT(1-e^{-2\beta t})}\right] \tag{9}$$

で与えられる。これは $t\to\infty$ でマクスエル分布になる。

こういうブラウン運動の理論について，私は多少不満をもつている。それはどういうことかというと，確率過程 $A(t)$ から，確率過程 $v(t)$ を導くべき基本の式，ランジバン方程式（2）の中に，すでに緩和の項，$-\beta v$ が入つていることについてである。この点でこういう在来の理論は，本質的な理論ではないと，私は思うのである。（9）をうるためには，（5）をアプリオリに仮定しなければならなかつたという不手際が現れるというのも，理論の不十分さの一つの反映であるのだと思う。random force $mA(t)$ の確率過程が，$\frac{d}{dt}v=A(t)$ によつて，v の確率過程にひきうつされるということによつて，理論が展開されるべきではないのか。random force の媒質中に，粒子が速度をもつてはいつてくると，粒子は random force から抵抗をうけるのである。電気抵抗などというものでも，そういうかたちで出てきていることを，私たちは知つている。こういう不満を解決したいというのが，以下に述べる話の目的である。

§2 準　備

二元合金や，イシング・スピンの協同現象の問題において，在来の平衡状態に関する理論を，非平衡の問題にまで拡張するこころみが，最近菊池によつて，行なわれている。[2] その立場は，平衡系における状態についてのエントロピーに相当して，ある定まつた状態から，いろんな他の状態へ移行する道すじについての確率あるいはエントロピーを導入するという考え方である。この理論の本筋を簡単に説明しよう。

m，n 等で系の状態を表わす。$N(\gg 1)$ の系のアンサンブルを考える。$P(n,t)$ は時刻 t における分布函数で，アンサンブル中，$NP(n,t)$ ケの系が，t において，状態 n にある。$NP(n,t;m,t')$ を以て，時 t

には状態nにあり，時t'には状態mにある系の数とする。即ち$P(n, t; m, t')$は二時間分布函数(two-gate distribution function)である。これらについては，

$$\sum_n P(n, t) = 1, \tag{10}$$

$$\sum_m P(n, t; m, t') = P(n, t), \tag{11}$$

$$\sum_n P(n, t; m, t') = P(m, t') \tag{12}$$

が成立つべきである。時間τの間に，系が状態nから状態mに移行する転移確率を$\tau\theta(n, m)$とする。そうすると，$P(n, t; m, t)$がすべてあたえられている時，アンサンブルのそういう移行が起る相対確率は，

$$W(P) = \frac{N!}{\prod_n \prod_m [NP(n, t; m, t+\tau)]!}$$

$$\times \prod_m \prod_n \tau\theta(n, m) \prod_n [1 - \tau \sum_m \theta(n, m)] \tag{13}$$

であたえられる。$k \ln W(P)$が状態の移行にかんするエントロピーと考えられる。系が温度Tの熱浴にさらされている場合には，このほかに，

$$S_b = (S_b)_e + \frac{N}{2T} \sum_m \sum_n [E(n) - E(m)] P(n, t; m, t+\tau) \tag{14}$$

をつけくわえねばならないことがわかる。$(S_b)_e$は，熱浴系の温度Tにおけるエントロピーである。$E(n)$は状態nにある系のエネルギーを意味する。そこで，系の状態移行にかんする全エントロピーは

$$S = S_s + P + S_b, \tag{15}$$

$$P = Nk \Big[\sum_m \sum_n P(n, t; m, t+\tau) \ln\{\tau\theta(n, m)\}$$

$$+ \sum_n P(n, t; m, t+\tau) \{1 - \tau \sum_{m(\neq n)} \theta(n, m)\} \Big], \tag{15a}$$

$$S_s = -Nk\sum_n\sum_m P(n, t; m, t+\tau)\ln P(n, t; m, t+\tau), \quad (15b)$$

$$S_b = \frac{N}{2T}\sum_m\sum_n\{E(n)-E(m)\}P(n, t; m, t+\tau) \quad (15c)$$

とかかれる。（11）式で，$t'=t+\tau$とした

$$\sum_m P(n, t; m, t+\tau) = P(n, t) \quad (16)$$

を条件として，（15）のSを極大にする。τの2次以上を無視すると，答は

$$P(n, t; m, t+\tau) = \tau\theta(n, m)P(n, t) \times \exp\left[\frac{E(n)-E(m)}{2kT}\right] \quad (17)$$

（16）と（12）で$t'=t+\tau$とした式とに，（17）を代入して，$\tau\to 0$とすることによつて，

$$\frac{dP(n, t)}{dt} = \sum_m\left[\theta(m, n)e^{\frac{E(m)-E(n)}{2kT}}P(m, t) - \theta(n, m)e^{\frac{E(n)-E(m)}{2kT}}P(n, t)\right], \quad (19)$$

のかたちに，rate equation がえられる。力学運動の可逆性によつて，

$$\theta(m, n) = \theta(n, m) \quad (20)$$

が，一般に成立つ。

§3　本　　論

§1でいつたように，私たちの出発点にするのは，（2）ではなくて，

$$\frac{dv}{dt} = A(t) \quad (21)$$

である。$mA(t)$ は random force を表わす。量子論においては，

$\theta(n,m)=\dfrac{2\pi}{\hbar}\left|\langle m|T|n\rangle\right|^2\delta(E_m-E_n)$（$(m|T|n)$ は転移行列）として，知つているが，古典論においては，これをどうとるべきであるか。われわれはこれを，以下述べる如くに与える。即ち（21）にしたがつて運動する粒子の分布函数 $f(v,t)$ をとると，それは

$$\frac{\partial f}{\partial t}+A\frac{\partial f}{\partial v}=0 \qquad (22)$$

をみたす。（22）は（21）のリウビユ方程式である。（22）を積分して，

$$f(v,t+\tau)-f(v,t)=-\int_0^\tau dt' A(t+t')\frac{\partial}{\partial v}f(v,t+t')$$

$$=-\int_0^\tau dt' A(t+t')\frac{\partial}{\partial v}f(v,t)+\int_0^\tau dt'\int_0^{t'}dt'' A(t+t')A(t+t'')$$
$$\times\frac{\partial^2}{\partial v^2}f(v,t)+\theta(A^3).$$

ここで，$A(t)$ は stationary Gaussian random process であるとして，確率平均をとると，

$$f(v,t+\tau)-f(v,t)=\alpha\tau\frac{\partial^2}{\partial v^2}f(v,t)+\theta(\tau^2) \qquad (23)$$

となる。ただし，τ は過程 $A(t)$ の相関時間にくらべて，ずつと大きいとして，

$$q=\int_0^\infty dt'\langle A(t')A(0)\rangle \qquad (24)$$

とおいた。$f(v,t)=\delta(v-v_0)$ とすると，

$$f(v,t+\tau)=\delta(v-v_0)+q\tau\frac{\partial^2}{\partial v^2}\delta(v-v_0). \qquad (25)$$

これから，転移確率 $\theta(v_0\to v)=\theta(v_0,v)$ は，

$$\theta(v_o, v) = q \frac{\partial^2}{\partial v^2} \delta(v - v_o) \tag{26}$$

で与えられることがわかる。これを（１９）式にいれて，和を積分にすると，

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t} = q \int dv' \left[P(v',t) e^{\frac{E'-E}{2kT}} \frac{\partial^2}{\partial v'^2} \delta(v - v') - P(v,t) e^{\frac{E-E'}{2kT}} \frac{\partial^2}{\partial v'^2} \delta(v - v') \right]$$

$$= q \left[\frac{\partial^2}{\partial v'^2} \left\{ P(v',t) e^{\frac{E'-E}{2kT}} - P(v,t) e^{\frac{E-E'}{2kT}} \right\} \right]_{v'=v}$$

をうる。ただし $E \equiv E(v)$，$E' \equiv E(v')$ とかいた。$E = \frac{m}{2} v^2$ として，簡単にすると，

$$\frac{\partial P}{\partial t} = q \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} + \beta \frac{\partial}{\partial v}(vP) \tag{27}$$

ただし

$$\beta = \frac{mq}{kT} \tag{28}$$

である。即ち（２１）からFokker-Planck 方程式（２７）を導くことができた。（２８）をアプリオリに仮定することなしに。ここでは（２７）は，必然的に導かれてきたのである。

§4　スピンの統計的理論

統計的理論[3)]においては，スピン緩和の方程式は，narrowing limit において，ブロッホ方程式がえられず，ブロッホ方程式で，温度を∞にしたものがえられるにすぎない。この点だけでなく，スピン運動の確率論はブラウン運動の場合と，大分ちがうように見えている。しかしながら，われわれ

が，§3で用いた方法を，そつくりそのまま使つて，ブロツホ方程式を導けることがわかつた。確率過程論の立場から見て，スピン緩和の問題も，ブラウン運動の問題も，これまで思つていたように，異なつた方法を使う必要もないのであつて，ただ力学の運動方程式がちがうから，ちがう結果に到達するだけのことである。スピン緩和の話は又の機会にゆずる。

吉森氏ら名大S研諸氏の討論に感謝します。この論文は基研森氏のおすすめで書きました。ブラウン運動にかんする既存の論文について，若干森氏から教えていただく所がありましたが，暇がなくて，それをこの中で生かすことはできませんでしたが，あわせて感謝いたします。

文　　献

1) S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys. 15 (1943), 1.

2) R. Kikuchi, Ann. of Phys. 10 (1960), 127.

3) A. Yoshimori and J. Korringa, Phys, Rov. 128 (1962), 1054.

R. Kubo, Lecture Note of Scottish Universites Summer School in 1961, p.23.

お 知 ら せ

◎ 次号（Vol. 1, No. 6）は「地球と物性物理」特集号として発行いたします。この特集号には，昨年12月，基研で行われた同じテーマの「成人学校」の講義ノートが掲載されます。

◎ 上の特集にともなつて，連載中の講義ノート，「二時間グリーン函数の理論とその応用」「分子生物学」は休載いたしますのでご諒承ください。